Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

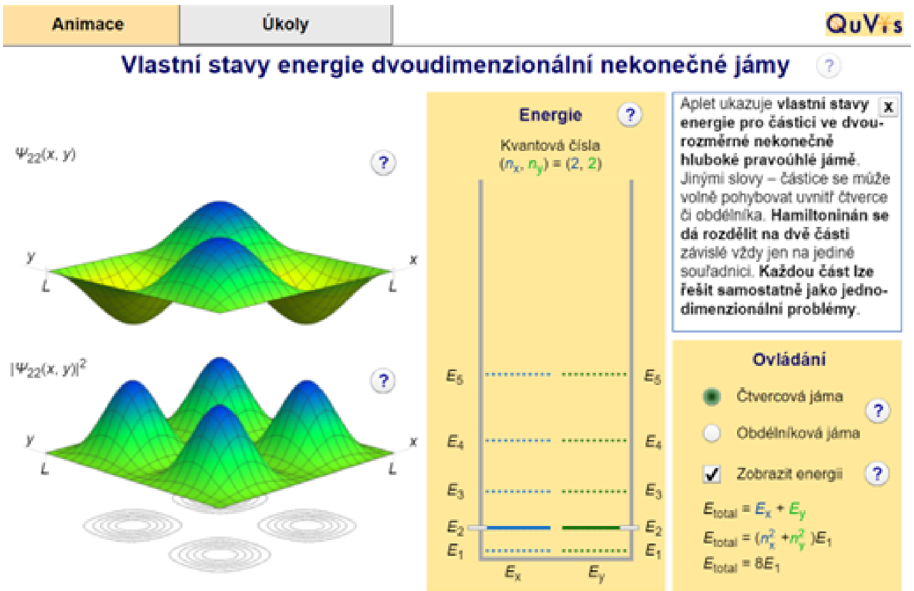
Zadání úloh

V následujícím pracovním listu se budete zabývat čtvercovou nebo obdélníkovou nekonečnou potenciálovou jámou. Připomeňte si, jak se pomocí jednodimenzionálních problémů poskládá řešení 2D problémů se separovatelnými proměnnými. Rovněž si připomeňte, jak se určí energie n-té hladiny a jaký tvar mají stacionární vlnové funkce 2D jámy.

Využijte odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující 2D potenciálovou jámu:

http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell2d/infwell2d.html

Na obrázku níže je aplet, se kterým budete pracovat:



Obrázek 1: Správně nastavený QuVis aplet.

Vlevo na stránce je vidět graf vlnové funkce a pod ním graf hustoty pravděpodobnosti. Uprostřed lze nastavit hodnotu kvantových čísel odpovídajících řešení příslušných jednodimenzionálních problémů, vpravo si můžete nechat zobrazit energii částice.

1. Nastavujte různé hodnoty kvantových čísel a pozorujte grafy vlnových funkcí příslušejících stavům popsaných danými kvantovými čísly. Zkuste odvodit vztah mezi hodnotou kvantových čísel a počtem lokálních extrémů vlnové funkce.

2. Jaká kombinace kvantových čísel zaručí, že výsledná vlnová funkce bude mít:

   - právě dva lokální extrémy?
   - právě šest lokálních extrémů?

Nejdříve si odpověď rozmyslete a poté svůj odhad ověřte nastavením příslušné kombinace kvantových čísel.

3. Pro každou z uvedených kombinací kvantových čísel určete souřadnice míst, kde nalezneme částici nacházející se v příslušném stavu s největší pravděpodobností:

   - $n_x = n_y = 1$,
   - $n_x = n_y = 2$.

   U prvního stavu nalezněte konkrétní souřadnice, u druhého stavu se pokuste alespoň slovně popsat hledané místo.

   Nápověda: Využijte graf hustoty pravděpodobnosti.

V následujících dvou úlohách se budete zabývat nekonečnou potenciálovou jámou obdélníkového půdorysu. Proto vpravo vyberte možnost „Obdélníková jáma“.

Pozorujte, jak vypadají grafy vlnových funkcí a hustot pravděpodobnosti. Rovněž si uvědomte, jak se změnilo energetické spektrum jámy potom, co jsme změnili její rozměry.

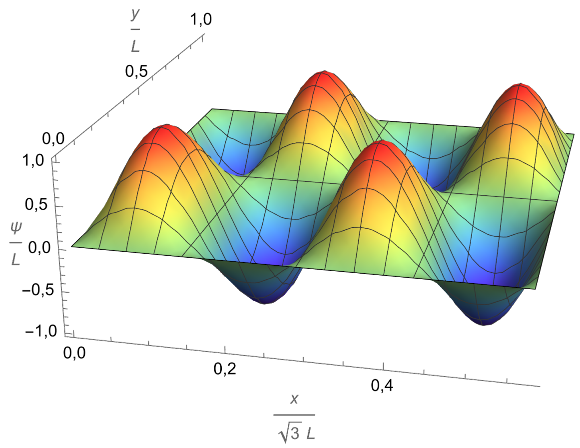
Aplet zobrazuje jámu o rozměrech $x = \frac{L}{\sqrt{2}}$ a $y = L$.

4. Pro tuto úlohu skryjte hodnoty energie. Jaká je celková energie částice nacházející se ve stavu popsaném kvantovými čísly:

   - $n_x = 3$, $n_y = 2$?
   - $n_x = n_y = 4$?

   Pokud jste již řešili úlohy na téma „Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor“, porovnejte mezi sebou řešení této úlohy.

5. Mějme následující graf:



Obrázek 2: Zadání úlohy 2.

- Jde o graf vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti? Vysvětlete.
- Jaká je celková energie částice nacházející se v tomto stacionárním stavu? Dejte pozor na správné určení rozměrů jámy. Upozorňuji, že tato jáma má jiné rozměry než jáma, se kterou pracujete ve čtvrté úloze.

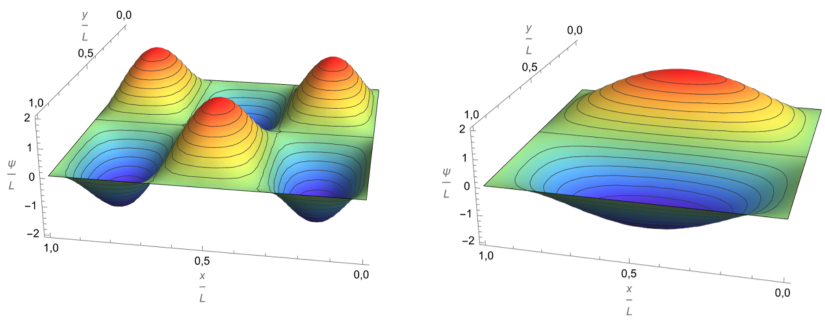
Řešení úloh z pracovního listu „Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma“

1. V jednorozměrné nekonečné pravoúhlé jámě je počet lokálních extrémů roven kvantovému číslu. Vlnová funkce dvou proměnných je dána součinem vlnových funkcí jedné proměnné, a proto je výsledný počet extrémů roven součinu počtu extrémů dílčích funkcí.

2. U jednodimenzionální jámy platí, že kvantové číslo je rovno počtu lokálních extrémů. Zde je situace analogická, kvantové číslo určuje počet extrémů podél dané osy. Výsledný počet extrémů je tedy dán součinem extrémů podél jednotlivých os. Hledáme tedy rozklad daného čísla na součin.

   - $2 = 2 \cdot 1 \to n_x = 1,\ n_y = 2$,
   - $6 = 2 \cdot 3 \to n_x = 3,\ n_y = 2$ nebo $6 = 1 \cdot 6 \to n_x = 1, n_y = 6$.

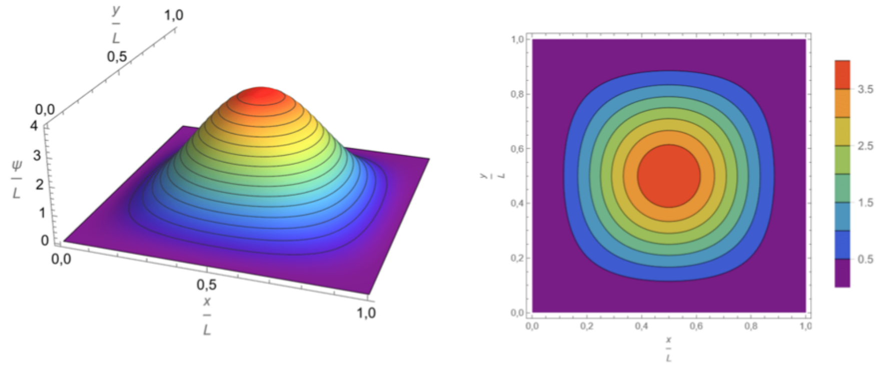
   U každé situace je možné kvantová čísla prohodit a výsledný počet extrémů zůstane zachován. Celkově tedy existují čtyři různá řešení této úlohy (viz obrázek 3).



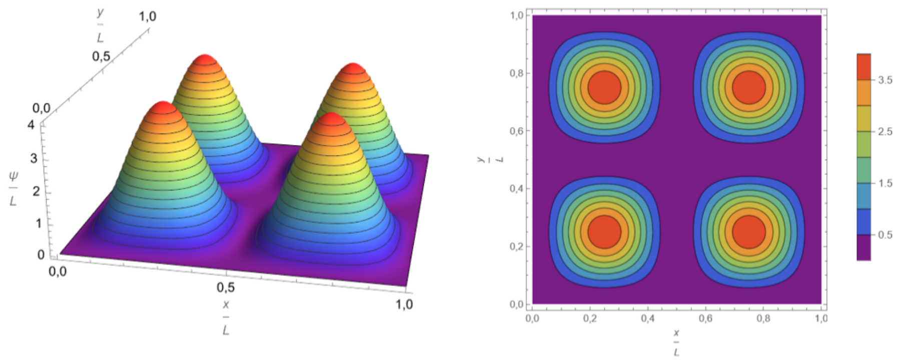
Obrázek 3: Vlnová funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$ (vlevo), resp. stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$ (vpravo).

3. - Zajímá nás, kde je hustota pravděpodobnosti odpovídající základnímu stavu největší. Toto místo se nachází ve středu jámy, to plyne z tvaru základního stavu částice v jednodimenzionální jámě. Pokud umístíme počátek souřadnicového systému do rohu jámy (viz obrázek 4), budou souřadnice hledaného místa $[\frac{L}{2}; \frac{L}{2}]$.
   - Nyní nás zajímají souřadnice lokálních maxim hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = n_y = 2$. Hustota pravděpodobnosti má čtyři lokální maxima, přičemž všechna mají stejnou hodnotu. Můžeme si představit spojnice maxim rovnoběžné se souřadnicovými osami. Potom tyto spojnice tvoří čtverec a hledaná místa jsou vrcholy tohoto čtverce. Souřadnice těchto míst jsou $[\frac{L}{4}; \frac{L}{4}]$,$[\frac{L}{4}; \frac{3L}{4}]$, $[\frac{3L}{4}; \frac{L}{4}]$ a $[\frac{3L}{4}; \frac{3L}{4}]$. Lze je dobře odečíst z vrstevnicového grafu. Kromě vrstevnicového grafu hustoty pravděpodobnosti níže uvádím i klasický graf, viz obrázek 5.

   Připomeňme, že ve čtvrté úloze počítáme s obdélníkovou jámou o rozměrech $x = \frac{L}{\sqrt{2}}$, $y = L$.



Obrázek 4: Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 1$.



Obrázek 5: Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 2$, $n_y = 2$.

4. Chceme určit, jaká je celková energie částice. Vzorec pro celkovou energii částice v nekonečné pravoúhlé jednorozměrné jámě je:
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$
Celková energie částice nacházející se v nekonečné obdélníkové jámě o zadaných rozměrech se vypočítá dle vzorce:
$$E = \frac{n_x^2\pi^2\hbar^2}{2m\left(\frac{L}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{n_y^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$
Dosazením příslušných kvantových čísel vyjádříme energii.

   - $n_x = 3,\ n_y = 2 \to E = \frac{3^2\pi^2\hbar^2}{2m\left(\frac{L}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{2^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} = \frac{11\pi^2\hbar^2}{mL^2}.$
   - $n_x = 4,\ n_y = 4 \to E = \frac{4^2\pi^2\hbar^2}{2m\left(\frac{L}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{4^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{16\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \frac{8\pi^2\hbar^2}{mL^2} = \frac{24\pi^2\hbar^2}{mL^2}.$

5. - Na obrázku 2 je graf vlnové funkce, neboť vyobrazená funkce nabývá i záporných hodnot.
   - Podle počtu lokálních extrémů jsme schopni určit jednotlivá kvantová čísla: $n_x = 4$, $n_y = 2$. Nyní dosadíme do vzorce pro energii, který jsme uvedli výše: $E = \frac{4^2\pi^2\hbar^2}{2m\cdot(\sqrt{3}L)^2} + \frac{2^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{14\pi^2\hbar^2}{3mL^2}.$